

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**FORMALISMO DA FUNÇÃO DE GREEN
DO NÃO-EQUILÍBRIO PARA SIMULAÇÃO
DE DISPOSITIVOS 1D**

Glenda Coimbra Santos

Brasília, março de 2014

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**FORMALISMO DA FUNÇÃO DE GREEN
DO NÃO-EQUILÍBRIO PARA SIMULAÇÃO
DE DISPOSITIVOS 1D**

Glenda Coimbra Santos

*Relatório submetido ao Departamento de Engenharia
Elétrica como requisito parcial para obtenção
do grau de Engenheiro Eletricista*

Banca Examinadora

Prof. Dr. Stefan Michael Blawid, ENE/UnB
Orientador

Profa. Dra. Janaína Gonçalves Guimarães,
ENE/UnB
Examinador interno

Profa. Dra. Artemis Marti Ceschin, ENE/UnB
Examinador interno

FICHA CATALOGRÁFICA

SANTOS, GLENDA COIMBRA

Formalismo da função de Green do não-equilíbrio para simulação de dispositivos 1D [Distrito Federal] 2014.

xi, 43 p., 210 x 297 mm (ENE/FT/UnB, Engenheiro, Engenharia Elétrica, 2014).

Trabalho de Conclusão de Curso - Universidade de Brasília, Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Elétrica

1. Função de Green

2. Nanofios de Silício

3. Transporte quântico

4. Condições limiares

I. ENE/FT/UnB

II. Título (série)

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

SANTOS, G. C. (2014). *Formalismo da função de Green do não-equilíbrio para simulação de dispositivos 1D*. Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Elétrica, Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 43 p.

CESSÃO DE DIREITOS

AUTOR: Glenda Coimbra Santos

TÍTULO: Formalismo da função de Green do não-equilíbrio para simulação de dispositivos 1D .

GRAU: Engenheiro Eletricista ANO: 2014

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias deste trabalho de conclusão de curso e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. Os autores reservam outros direitos de publicação e nenhuma parte desse trabalho de conclusão de curso pode ser reproduzida sem autorização por escrito dos autores.

Glenda Coimbra Santos

Qd.102 Lt. 04 Bloco B

CEP 71907-000 Brasília - DF - Brasil

Dedicatória

Aos meus pais

Glenda Coimbra Santos

Agradecimentos

Aos meus pais Ilmar e Francirene, por serem meu apoio e suporte em todas as circunstâncias. Às minhas amigas, Talita, Mariana e Natália, por serem meu refúgio nas horas de angústia. Ao meu irmão Mauro, por ser o sopro de ar fresco na minha vida. Ao meu namorado Gilmar, que me mostrou pela primeira vez como é bom estar apaixonada. Ao Professor Stefan, pela paciência, pela excelente orientação e principalmente por ser tão dedicado a transmitir seus conhecimentos a qualquer um que queira aprender.

Glenda Coimbra Santos

RESUMO

Novos materiais de dimensões reduzidas como nanotubos de carbono, nanofios semicondutores e nanofibras de polímeros oferecem propriedades eletrônicas únicas, que podem ser exploradas em dispositivos como transistores de efeito de campo. No entanto tecnologias emergentes baseadas nesses novos materiais não são desenvolvidas o suficiente para demonstrar seu potencial uso na fabricação de circuitos integrados apresentando apenas protótipos. Assim, simulações de dispositivos são ferramentas essenciais para o desenvolvimento de tecnologias emergentes. Neste projeto o objetivo é implementar um simulador de um nanofio com a plataforma MATLAB. Como a física de materiais de uma dimensão difere drasticamente do comportamento do corpo de estado sólido, o simulador será baseado não nas equações clássicas de difusão e deriva, mas no formalismo da Função de Green de não-equilíbrio, que será explicado didaticamente.

ABSTRACT

New materials of reduced dimensions like carbon nanotubes, semiconducting nanowires and polymer nanofibres offer unique electronic properties which could be explored in devices like field-effect transistors. However, emergent technologies based on these new materials are not sufficient developed to demonstrate their usefulness for integrated circuits and often only provide prototypes. Therefore, device simulations are essential tools for the development of emergent technologies. The objective of the given project is to implement a simulator for nanowires employing a MATLAB platform. The physics of one-dimensional materials differ drastically from the bulk behavior of solids and, thus, the simulator has to be based not on the semiclassical equations of drift and diffusion but on the solution of the quantum mechanical Schrödinger equation. To this extent, the mathematical formalism of Greens functions has been applied, which is explained didactically in great detail.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	METODOLOGIA.....	5
2.1	EQUAÇÃO DE POISSON	5
2.2	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	6
2.3	MATRIZ HAMILTONIANA.....	7
2.4	MATRIZ DE DENSIDADE	9
2.5	DIAGONALIZAÇÃO.....	13
2.5.1	CONDIÇÕES LIMIARES NULAS	14
2.5.2	CONDIÇÕES LIMIARES PERIÓDICAS.....	14
2.6	FUNÇÃO DE GREEN	15
2.6.1	FUNÇÃO DE GREEN PARA O EQUILÍBRIO	15
2.6.2	AUTO-ENERGIA	16
2.6.3	FUNÇÃO DE GREEN PARA O NÃO-EQUILÍBRIO	17
2.7	DETALHES DE IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO	18
2.7.1	POTENCIAL ELETROQUÍMICO NO EQUILÍBRIO	18
2.7.2	CONDIÇÕES LIMIARES FLUTUANTES	19
2.8	TRANSPORTE COERENTE	20
2.8.1	FORMALISMO DA TRANSMISSÃO E CORRENTE	21
2.9	TRANSPORTE NÃO-COERENTE	22
3	RESULTADOS E ANÁLISES	25
3.1	NANOFIO EM EQUILÍBRIO	25
3.1.1	DIAGONALIZAÇÃO COM CONDIÇÕES LIMIARES NULAS	25
3.1.2	DIAGONALIZAÇÃO COM CONDIÇÕES LIMIARES PERIÓDICAS.....	25
3.1.3	FUNÇÃO DE GREEN COM CONDIÇÕES LIMIARES PERIÓDICAS	28
3.1.4	FUNÇÃO DE GREEN COM CONDIÇÕES LIMIARES ABERTAS	29
3.2	NANOFIO EM NÃO-EQUILÍBRIO.....	30
3.2.1	FUNÇÃO DE GREEN COM TRANSPORTE COERENTE	30
3.2.2	FUNÇÃO DE GREEN COM TRANSPORTE INCOERENTE	35
4	CONCLUSÃO.....	39
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	41
	ANEXOS.....	43

LISTA DE FIGURAS

1.1	Dispositivo simulado	2
1.2	Nanofios de silício.....	2
1.3	Nanotubo de Carbono de parede única.....	3
1.4	Estrutura do nanotubo e do nanofio	3
2.1	Dimensões do nanofio	8
2.2	Discretizando o dispositivo em pontos igualmente espaçados.....	8
2.3	Distribuição de Fermi	9
2.4	Modelo analisado em equilíbrio	11
2.5	Modelo analisado em não-equilíbrio.....	11
2.6	Distribuição de F_0	12
2.7	Procedimento auto-consistente	12
2.8	Fluxograma das iterações pela diagonalização	13
2.9	Condições limiares nulas	14
2.10	Condições limiares periódicas.....	14
2.11	Distribuição Gaussiana.....	16
2.12	Fluxograma das iterações pela função do green	18
2.13	Redistribuição de cargas	18
2.14	Novo perfil de distribuição de cargas	19
2.15	Função de transmissão típica de um nanofio balístico.....	22
2.16	Processos dispersivos caracterizados como contatos virtuais.....	23
3.1	A, Perfis da densidade de cargas móveis neq e da densidade de cargas de dopagem N_D ; B, Perfil da energia potencial para o nanofio em equilíbrio com condições limiares nulas.....	26
3.2	A, Perfis da densidade de cargas móveis neq e da densidade de cargas de dopagem N_D ; B, Perfil da energia potencial para o nanofio em equilíbrio com condições limiares periodicas. .	27
3.3	Região intermediária.....	28
3.4	Condições limiares periódicas com a função de Green	28
3.5	Condições limiares abertas	29
3.6	Condições limiares abertas para um nanofio sem dopagem	30
3.7	Perfil de densidade no transporte coerente	31
3.8	Potencial elétrico no transporte coerente	31
3.9	Transmissão do transporte coerente.....	32
3.10	Função de transmissão $T(E)$ e de $K(E)$ para: A, tensão=0 ; B, tensão=0.15 ; C, tensão=0.25. .	33
3.11	Curva Característica para o transporte coerente.....	33
3.12	Perfil de densidade de cargas no transporte incoerente.....	35
3.13	Perfil do potencial elétrico no transporte incoerente	35
3.14	Exemplo de função de transmissão do transporte incoerente	36

3.15	Função de transmissão $T(E)$ e $K(E)$ para o modelo com espalhamento: A, tensão=0 ; B, tensão=0.15 ; C, tensão=0.25	37
3.16	Curva característica do transporte incoerente	37

LISTA DE TABELAS

3.1	Tensões aplicadas e Tensões no nanofio no transporte coerente	34
3.2	Resistências no transporte coerente	34
3.3	Tensões aplicadas e Tensões no nanofio no transporte incoerente	38
3.4	Resistências no transporte incoerente	38

LISTA DE SÍMBOLOS, NOMENCLATURA E ABREVIACÕES

q	Carga do elétron
m	Massa do elétron
h	Constante de Planck
K_B	Constante de Boltzman
T	Temperatura
V	Tensão
I	Corrente
g	Condutância
Ψ	Função de onda do elétron
μ	Potencial eletroquímico
ε	permissividade
$G(E)$	Função de Green
$A(E)$	Função Espectral
$T(E)$	Função de transmissão
$K(E)$	Densidade de corrente
Σ	Matriz de auto-energia
Γ	Matriz de Broadening

1 INTRODUÇÃO

A miniaturização de circuitos integrados é uma demanda constante no mercado tecnológico. Em 1965, Gordon E. Moore, então presidente da Intel, previu que a cada período de 18 meses o número de transistores em uma placa de mesmo tamanho dobraria pelo mesmo custo. No entanto, a redução das dimensões em tecnologias baseadas em silício, ou seja, o aumento do poder de processamento dos circuitos integrados, tem chegado ao seu limite. Para o correto funcionamento dos circuitos é preciso um espaçamento mínimo entre dois transistores adjacentes para que não ocorra interferência. Atualmente a tecnologia CMOS fabrica transistores com canais de até 20 nm de comprimento possibilitando uma enorme quantidade de transistores em uma pequena placa e novos métodos de síntese permitem a fabricação de nanofios de 5 a 20 nanômetros de comprimento[1]. Assim, a pesquisa e o estudo de novos materiais têm sido fundamental para o desenvolvimento de uma nova tecnologia que possa dar continuidade à previsão de Moore.

O estudo do transporte de cargas em nanomateriais como nanofios de Silício (SiNWs), nanotubos de grafeno e nanofibras tem mostrado propriedades bastante interessantes que podem ter variadas aplicações. Essa aplicabilidade está sendo estudada tanto para a redução de dimensões de circuitos digitais quanto para o desenvolvimento de circuitos analógicos de maior frequência. A continuidade e desenvolvimento do estudo desses materiais têm sido possíveis pelo avanço do desempenho dos microscópios eletrônicos e pelos novos métodos de síntese desses nanomateriais.

Dispositivos de diâmetros tão reduzidos permitem que a sua modelagem possa ser feita considerando apenas uma dimensão, o que diminui os processos dispersivos. De modo que o espalhamento é reduzido porque o elétron só pode ser refletido [2].

A possibilidade de transporte de elétrons sem processos dispersivos, que alteram tanto a direção quanto a energia do elétron, permite que o nanofio seja tratado como um condutor balístico, ou seja, canal pelo qual os elétrons passam sem colisões [3] [4]. Nele a condução é feita com o menor valor de energia possível. Em dispositivos de silício essa propriedade é verificada em nanofios a baixas temperaturas.

Um dos principais processos dispersivos é a colisão dos elétrons com os átomos e sua consequente geração de calor. Por isso circuitos elaborados com condutores balísticos dispensam sistemas de resfriamento dispendiosos.

Por se tratarem de dispositivos de dimensões da ordem do comprimento de onda dos elétrons (algumas dezenas de nanômetros se o canal não tiver espalhamento) as propriedades dessas nanoestruturas não podem ser modeladas com conceitos macroscópicos como difusão e deriva. Assim, para o entendimento completo do funcionamento do dispositivo simulado é necessário relembrar conceitos de mecânica clássica e mecânica quântica, já que leis de transporte mudam drasticamente do mundo macroscópico para o mundo microscópico [5]. Estes conceitos serão revistos mais a diante.

No estudo dos nanomateriais verifica-se um excelente controle das suas propriedades. Apenas a dopagem do material e a temperatura determinam se ele é um condutor ou um semicondutor. Em escala atômica, o mesmo material pode ter propriedades diferentes, por exemplo, o ponto de fusão do ouro aumenta quando tratado como algumas moléculas. Em escala nanométrica condutores podem se comportar

como semicondutores.

Um longo caminho será percorrido até que novos dispositivos baseados em nanomateriais sejam produzidos em larga escala. Estamos ainda em fase de desenvolvimento de modelos e protótipos para conhecer seu funcionamento adequadamente. Para a criação de protótipos é necessário o emprego de ferramentas computacionais que simulam o funcionamento desses dispositivos.

Este trabalho tem como objetivo fornecer uma dessas ferramentas, ainda que de funcionalidade bem reduzida. O dispositivo simulado (Fig.1.1) tem uma estrutura simples e consiste em um nanofio acoplado a dois contatos metálicos submetido a uma tensão de baixa magnitude. Nesta simulação a máxima tensão aplicada é de 0.25V.

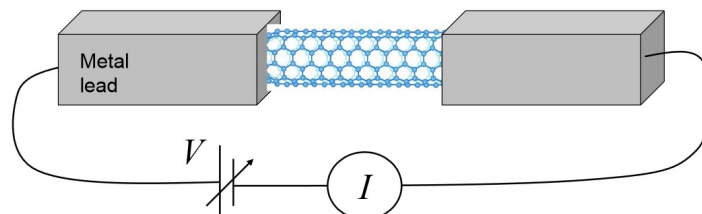


Figura 1.1: Dispositivo simulado

Para a criação desse simulador foi feito o uso do formalismo da função de Green do não-equilíbrio que permite modelar o funcionamento desse dispositivo em nível quântico [6] [7] . Os códigos das simulações são feitos de forma modular na plataforma MATLAB, o que facilita a incorporação de um terceiro contato ao dispositivo podendo assim modelar o funcionamento de um transistor.

O formalismo de Green para o não-equilíbrio permite calcular com precisão os efeitos dos processos dispersivos em um condutor. Se os elétrons perdem energia durante o transporte essa perda necessita ser calculada, afinal trata-se de um dispositivo nanométrico e a condução envolve poucos elétrons [8] [9] .

A ressonância é um fenômeno verificado no transporte de cargas em nanofios. Ela pode ser aproveitada para potencializar a transmissão dos elétrons, para alguns valores de energia. A figura 1.2 mostra um processo de síntese de nanofios de silício.

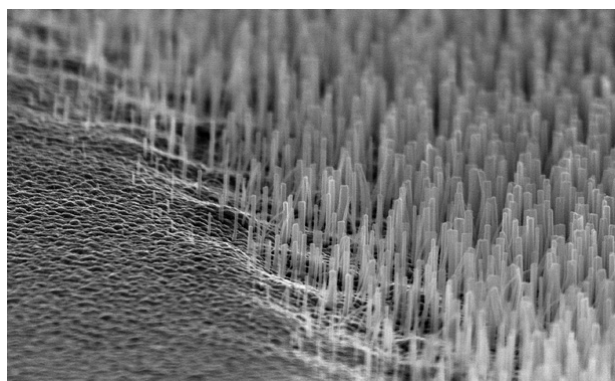


Figura 1.2: Nanofios de silício [10]

Alguns tipos de estruturas que têm sido pesquisadas para substituir o silício são: nanotubos de carbono (Fig. 1.3), grafeno, DNA, eletrônica molecular (moléculas orgânicas e inorgânicas), nanofios (orgânicos e

inorgânicos), proteínas, molecular spintrônica, nanocompósitos (mistura de outros materiais com o carbono para formar compósitos com propriedades adquiridas dos nanotubos de carbono).

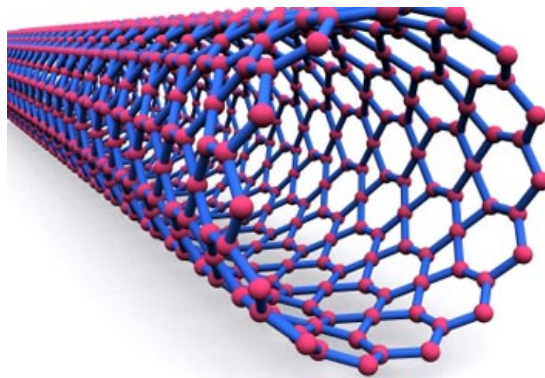


Figura 1.3: Nanotudo de Carbono de parede única

O nanotubo de carbono consiste em uma folha de grafeno enrolada em que a movimentação de elétrons ocorre apenas na superfície do canal. Como a estrutura é ôca os elétrons são transmitidos apenas onde existem os átomos de carbono. A diferença entre a estrutura do nanofio de silício e o nanotubo de carbono pode ser vista na figura 1.4.

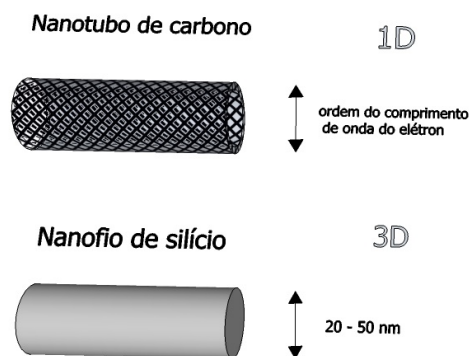


Figura 1.4: Estrutura do nanotubo e do nanofio

2 METODOLOGIA

2.1 EQUAÇÃO DE POISSON

A equação de Poisson descreve o potencial elétrico em função da distribuição de cargas em três dimensões $\rho(x, y, z)$ e é facilmente derivada das leis do eletromagnetismo clássico para campos eletrostáticos [11].

A definição de potencial eletrostático é a força que um campo elétrico exerce sobre uma carga pontual, de modo que, conhecendo a distribuição das cargas, determina-se o seu perfil ao longo do dispositivo.

A Lei de Gauss na forma pontual é determinada por:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$

Em que D é o campo de deslocamento elétrico de unidade (C/m^2) , e ρ é a densidade de cargas expressa em (C/m^3) .

Para um material isotrópico e linear, o campo de deslocamento D é proporcional ao campo elétrico E , e a razão entre essas duas grandezas é a constante ϵ , que é a permissividade do material. Obtendo assim a relação:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}$$

Substituindo, temos:

$$\nabla \cdot (\epsilon \vec{E}) = \rho$$

ou

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (2.1)$$

Calculando o campo elétrico a partir do potencial elétrico Φ em gradiente temos:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \cdot \Phi \quad (2.2)$$

Substituindo a Eq.(2.2) na Eq.(2.1) obtemos a equação de Poisson:

$$\vec{\nabla} \cdot (-\vec{\nabla} \cdot \Phi) = \frac{\rho}{\epsilon}$$

Assim, a variação do campo elétrico com a posição é proporcional à distribuição de cargas no local. A energia potencial U é dada pela relação:

$$U = -q * \Phi$$

Como temos uma distribuição de cargas tridimensional a derivada de segunda ordem é expressa nas três direções (x, y, z) :

$$\left(\frac{d^2U}{dx^2} + \frac{d^2U}{dy^2} + \frac{d^2U}{dz^2}\right) = -\frac{\rho}{\varepsilon}$$

Entretanto nessa análise a variação do potencial é considerada em apenas uma dimensão (x) . Assim omitindo o índice a equação de Poisson toma a forma:

$$\nabla(\varepsilon \nabla U) = q^2[N_D - N_A - n + p]$$

Em que n é a densidade de portadores negativos, p é a densidade de portadores positivos e expressando a densidade como $\rho = q * N$. N_D é a densidade de átomos de dopagem doadores e N_A a densidade átomos de dopagem de elementos aceitadores. Como no caso os portadores móveis são os portadores negativos a equação de poisson assume uma forma mais simples:

$$\nabla(\varepsilon \nabla U) = q^2[N_D - n] \quad (2.3)$$

Essa é a forma da Equação de Poisson que utilizaremos.

2.2 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Os alicerces da mecânica quântica foram estabelecidos durante a primeira metade do século XX (o que é relativamente recente) por Albert Einstein, Werner Heisenberg, Max Planck, Louis de Broglie, Niels Bohr, Erwin Schrödinger, John von Neumann, Paul Dirac e Richard Feynman [12].

Em 1926, Erwin Schrödinger, deduziu a equação que permite obter matematicamente a função de onda que descreve a movimentação de um elétron. Essa equação unidimensional e independente do tempo tem a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.4)$$

Em que $\Psi(x)$ é a função de onda, m é a massa do elétron e \hbar é a constante de Planck normalizada, ou seja, $\hbar = h/2\pi$. A equação de Schrödinger foi escolhida para ser independente do tempo porque queremos modelar um estado de equilíbrio depois de um grande período de tempo em que o sistema se estabelece.

Essa equação pode ser apresentada na notação de operadores :

$$[H]\Psi_\alpha(r) = \varepsilon_\alpha \Psi_\alpha(r) \quad (2.5)$$

Em que H é a matriz do Operador Hamiltoniano, $\Psi_\alpha(r)$ são os autovetores da matriz H , ou seja, as funções de onda, e ε_α são os autovalores, ou os níveis de energia.

A definição da matriz do operador hamiltoniano é $H = [H_0 + U]$, em que H_0 é o hamiltoniano resolvendo apenas para a energia cinética, $H_0 \equiv (\hbar^2/2m)\nabla^2$.

A solução da Eq.(2.4) para uma energia potencial nula é:

$$\Psi_{+k}(x) = e^{+ikx}/\sqrt{L} \quad \Psi_{-k}(x) = e^{-ikx}/\sqrt{L}$$

com a energia dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

que é a solução para a energia cinética.

As soluções das funções de onda são $\Psi_{+k}(x)$ para elétrons vindo da esquerda e $\Psi_{-k}(x)$ para elétrons vindo da direita. O quadrado da função de onda fornece a densidade de probabilidade de o elétron ter a energia E , justificando assim o presença do fator \sqrt{L} . Quando a densidade de probabilidade é multiplicada pelo comprimento obtemos a probabilidade de o elétron se encontrar naquela região, que nesse caso deve ser um.

2.3 MATRIZ HAMILTONIANA

A matriz hamiltoniana $[H]$ fornece uma descrição das bandas de condução do semiconductor [13]. Neste trabalho o hamiltoniano utilizado é o de massa-efetiva, o qual indica que o dispositivo tem apenas elétrons da banda de condução parabólica com o menor valor de energia. No entanto hamiltonianos mais complicados podem ser usados no mesmo procedimento.

É de fundamental importância representar $[H]$ em um espaço de bases que seja conveniente para os cálculos a serem feitos. Isso é determinante tanto na dificuldade de implementar os cálculos quanto para interpretação do seu sentido físico.

A representação em autovalores da matriz hamiltoniana é uma forma bastante simples e intuitiva e será explicada detalhadamente. No estudo do nanofio, $[H]$ pode ser separada em uma parte longitudinal $[H_L]$ e uma parte transversal $[H_T]$ fazendo a análise sobre 3 dimensões separadamente como visto na Figura 2.1.

$$H = H_L + H_T$$

$$H_L \equiv E_c - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (2.6)$$

$$H_T \equiv E_c - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dydz} + U(y, z) \quad (2.7)$$

Resolver H_L no espaço discretizado é feito pelo método de diferenças finitas na forma matricial.

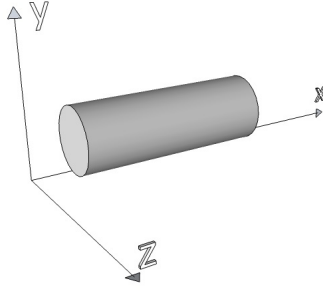


Figura 2.1: Dimensões do nanofio

Colocando a operação da segunda derivada no domínio discreto:

$$[H_L]\Psi_n = -t\Psi_{n-1} + (E_c + 2t + U_n\Psi_n) - t\Psi_{n+1} \quad (2.8)$$

Em que $t \equiv \hbar^2/2ma^2$ tem unidade eV e a é a distância entre dois pontos adjacentes no dispositivo como visto na Figura 2.2.

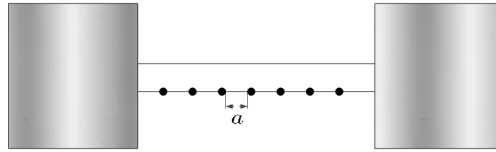


Figura 2.2: Discretizando o dispositivo em pontos igualmente espaçados

Os elementos da diagonal da matriz hamiltoniana representam cada ponto do dispositivo. Colocando a equação de diferenças finitas na forma matricial teremos:

$$H_L = \begin{bmatrix} E_c + 2t + U_1 & -t & \dots & 0 & 0 \\ -t & E_c + 2t + U_2 & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & & E_c + 2t + U_{N-1} & -t \\ 0 & 0 & & -t & E_c + 2t + U_N \end{bmatrix}$$

A definição de $[H]$ é $H = H_0 + U$.

No código a matriz H_0 é criada na linha:

```
H0=(t0*2*diag(ones(xnum,1)))+(-t0*diag(ones(xnum-1,1),1))
+(-t0*diag(ones(xnum-1,1),-1));
```


e o valor de U é determinado de maneira iterativa.

É importante lembrar como lidaremos com H_T já que o estudo do nosso dispositivo é feito apenas por H_L .

A parte transversal de $[H]$ vai modificar a distribuição das energias no dispositivo como será visto no próximo capítulo.

2.4 MATRIZ DE DENSIDADE

Na teoria do transporte quântico, a matriz de densidade é o valor de maior interesse já que a partir dela todos os outros valores necessários para modelar o funcionamento do dispositivo podem ser obtidos [13].

A densidade de elétrons é dada pela relação:

$$n(r) = \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(r)|^2 f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu) \quad (2.9)$$

A função de Fermi, f_0 obtém a probabilidade de o nível de energia correspondente a ε_{α} estar ocupado por um elétron, $|\Psi_{\alpha}(r)|^2$ fornece a densidade de probabilidade de um elétron ocupar a posição correspondente a ε_{α} , obtendo assim a densidade de elétrons. A função de Fermi é dada por:

$$f_0(E - \mu) \equiv (1 + \exp[(E - \mu)/k_B T])^{-1} \quad (2.10)$$

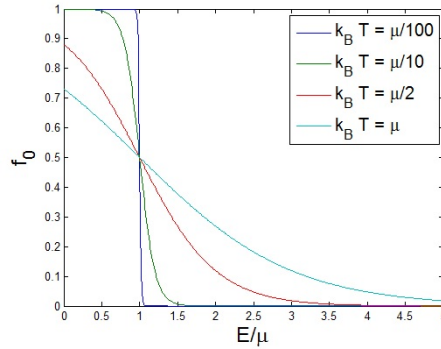


Figura 2.3: Distribuição de Fermi

Como se pode inferir do gráfico da Figura 2.3, níveis muito abaixo do nível de Fermi, μ têm grande probabilidade de estarem ocupados e níveis muito mais altos têm pouca probabilidade de estarem ocupados. Essa distribuição depende do valor da temperatura T que nesse caso foi determinada como sendo de 300 Kelvin o que determina que todos os íons de dopagem estão ionizados.

De uma maneira mais geral a densidade de elétrons é obtida a partir de:

$$n(r) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha} \Psi_{\alpha}^* \rho_{\alpha\alpha} \quad (2.11)$$

Em que $\rho_{\alpha\alpha}$ é a matriz de densidade no caso do equilíbrio, que é diagonal, por isso os índices da matriz são indicados apenas por α . No espaço de representação em autovalores os elementos da diagonal são as probabilidades de ocupação de cada nível de energia.

$$\rho_{\alpha\alpha} = f_{\alpha} = f_0(\varepsilon_{\alpha} - \mu)$$

$$[\rho] = \begin{bmatrix} f_0(\varepsilon_1 - \mu) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & f_0(\varepsilon_2 - \mu) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & f_0(\varepsilon_3 - \mu) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Determinar a matriz de densidade $[\rho]$ por esse método é conhecido como diagonalização, já que os elementos da diagonal fornecidos pelos autovalores determinam a densidade de elétrons. Fazendo a transformação de $[\rho]$ para a representação em espaço real os elementos da diagonal correspondem à densidade de elétrons ponto a ponto.

Outra maneira de determinar a matriz de densidade $[\rho]$ é por meio da função de Green. Nesse caso $[\rho]$ é determinada por:

$$[\rho] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_0(E - \mu) [A(E)] \quad (2.12)$$

$$A[E] = \delta(EI - H)$$

Em que a função espectral $[A(E)]$ permite integrar as probabilidades de ocupação sobre todos os níveis de energia.

A Eq.(2.12) só pode ser aplicada se ao longo do dispositivo tivermos apenas um nível de Fermi μ_1 , ou seja, se estiver em condição de equilíbrio. No entanto neste trabalho um nanofio será submetido a uma tensão, dando origem a dois níveis de Fermi diferentes em cada contato (μ_1 e μ_2). Para esse caso será derivada uma nova fórmula para $[\rho]$. Os casos de equilíbrio e não-equilíbrio são representados nas figuras (2.4) e (2.5).

Intuitivamente tendemos a imaginar que o dispositivo teria um nível de Fermi entre os valores μ_1 e μ_2 , porém a dinâmica dessa determinação no nanofio é mais complicada. Os níveis de energia são correlacionados, fazendo-se necessária uma análise mais profunda. Temos uma relação entre dois níveis de energia (α e β).

$$n(r) = \sum_{\alpha, \beta} \Psi_{\alpha}(r) \Psi_{\beta}^*(r) \rho_{\alpha, \beta} \quad (2.13)$$

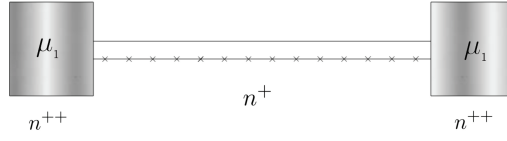


Figura 2.4: Modelo analisado em equilíbrio

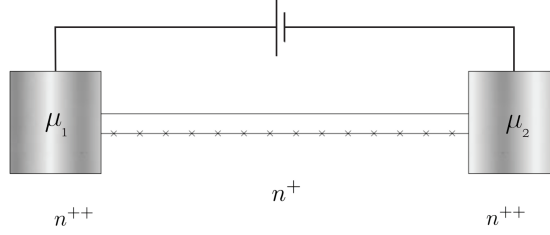


Figura 2.5: Modelo analisado em não-equilíbrio

Nesse caso a matriz de densidade já não é mais diagonal já que os níveis de energia são correlacionados.

A probabilidade de ocupação dos elétrons que vêm da direita e dos elétrons que vêm da esquerda depende do potencial eletroquímico do contato pelo qual o elétron está entrando no dispositivo. Assim, cada contato tem uma função espectral A_1 e A_2 , fazendo com que a matriz de densidade seja determinada por:

$$\rho = \int \frac{dE}{2\pi} [f_0(E - \mu_1)A_1 + f_0(E - \mu_2)A_2] \quad (2.14)$$

Incluir na análise a parte transversal do hamiltoniano $[H_T]$ significa fazer a substituição da função de Fermi f_0 nas equações anteriores por F_0 .

$$F_0(E - \mu) = \sum_k f_0(E + \varepsilon_k - \mu) = S \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln(1 + \exp[(\mu - E)/k_B T]) \quad (2.15)$$

Em que S é a área da seção transversal e os valores ε_k são as autoenergias do hamiltoniano transversal. Assim, F_0 é derivada da função de Fermi somando para todos os autovalores independentes de cada canal do nanofio. Incluiremos soma de todos os possíveis estados, ou seja, multiplica-se por 2 para incluir os dois spins. Os modos transversais são independentes entre si já que são canais em paralelo.

Por exemplo, a matriz de densidade pelo método da diagonalização agora tem a forma:

$$[\rho] = \begin{bmatrix} F_0(\varepsilon_1 - \mu) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & F_0(\varepsilon_2 - \mu) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & F_0(\varepsilon_3 - \mu) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

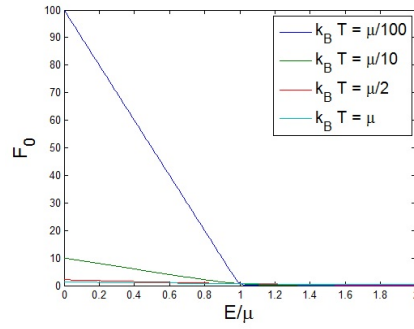


Figura 2.6: Distribuição de F_0

A distribuição de F_0 tem esse formato (Fig. 2.6) porque agora não se trata de função de probabilidade mas de um somatório para todos os modos transversais.

No código desenvolvido foram utilizados os dois métodos apresentados para determinar a matriz de densidade: o método da diagonalização e o método da função de Green. O perfil de densidade de cargas e o perfil de potencial elétrico são obtidos por meio de um procedimento auto-consistente que é mostrado na figura 2.7.

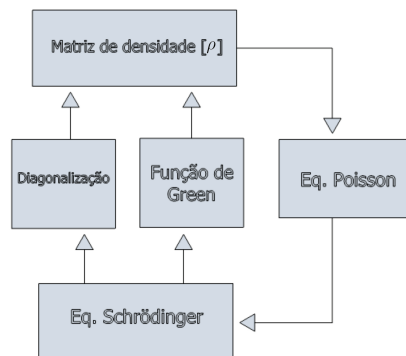


Figura 2.7: Procedimento auto-consistente

Na análise de resultados será mostrado que quando é aplicada uma tensão o perfil de densidade de portadores varia pouco, sendo que necessariamente deve haver mudanças no perfil de potencial.

2.5 DIAGONALIZAÇÃO

Na representação em autovalores a matriz de densidade é diagonal e os elementos são as probabilidades de ocupação de cada nível de energia. Essa característica facilita operações com cálculos analíticos.

Os autovalores e autovetores da matriz $[H]$ são encontrados facilmente com um comando no MATLAB.

```
[V,D]=eig(H);
```

Em que $[V]$ é a matriz com os autovetores e $[D]$ dos autovalores de $[H]$.

No código a matriz de densidade é implementada com os comandos:

```
en(i) = D(i,i);
ferm(i) = log(1+(exp((EFermi-en(i))/KbT)));
rhoes(i,i) = densf*ferm(i);
```

Em transformações unitárias a soma dos elementos da diagonal é constante. Após a transformação do espaço de autovalores para o espaço real a matriz $[\rho]$ apresenta elementos fora da diagonal, porém eles não têm sentido físico. Uma transformação unitária é feita para representar a matriz de densidade em espaço real. Essa matriz de transformação é obtida com os autovetores de $[H]$.

$$[\rho] = [V][\rho][V^+]$$

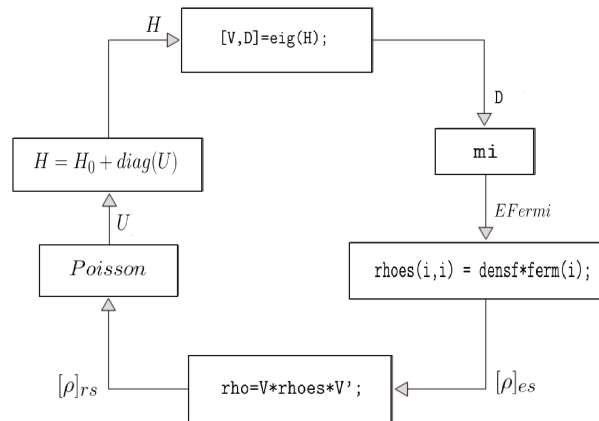


Figura 2.8: Fluxograma das iterações pela diagonalização

O fluxograma das iterações do procedimento auto-consistente utilizando o método de diagonalização é visualizado na figura 2.8. A equação de Poisson fornece o perfil de potencial dado o perfil de densidade de cargas e a equação de Schrödinger fornece o perfil de densidade de cargas dado o potencial. Obtidos os autovalores e os autovetores de $[H]$ a equação de Schrödinger é resolvida. As condições limiares são necessárias para encontrar a solução da função de onda e pelo método da diagonalização usaremos duas delas: condições limiares nulas e condições limiares periódicas. Essas condições limiares permitem modelar os contatos. A diagonalização pode ser usada apenas para o modelo no equilíbrio.

2.5.1 Condições limiares nulas

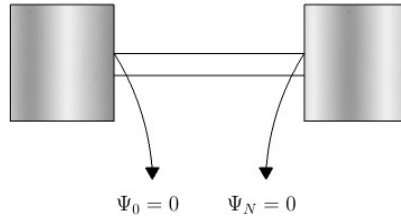


Figura 2.9: Condições limiares nulas

Com condições limiares nulas determina-se que $\Psi_0 = \Psi_N = 0$ na região dos contatos, ou seja, na região dos contatos existe uma barreira de potencial que impede a transmissão de elétrons fazendo com que o valor da função de onda do elétron seja nula nesse ponto. Essa condição é verificada na figura 2.9. No código essa condição é determinada com o comando:

```
U(1) = 1000
U(xnum) = U(1)
```

2.5.2 Condições limiares periódicas

Com condições limiares periódicas determina-se que $\Psi_0 = \Psi_{N+1}$. Como pode ser visto na figura 2.10 essa condição é determinada se um elétron que sai por um contato entra novamente no nanofio pela outra extremidade.

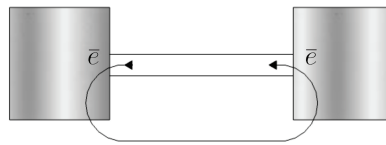


Figura 2.10: Condições limiares periódicas

Nesse caso $\Psi_{N+1} = \Psi_0$ e essa condição é implementada com a mudança de 2 elementos da matriz H_L . Determina-se $H_L(1, N) = H_L(N, 1) = -t_0$.

```
H0(1, xnum) = - t0
H0(xnum, 1) = - t0
```

2.6 FUNÇÃO DE GREEN

Em matemática uma função de Green é um método para resolver equações diferenciais não-homogêneas sujeitas a condições iniciais e condições limiares determinadas, como a equação de onda.

A forma da função de Green será apresentada tanto para o caso do equilíbrio quanto para o caso do não-equilíbrio.

2.6.1 Função de Green para o equilíbrio

Como apresentado anteriormente, a matriz de densidade $[\rho]$ pode ser expressa em termos da função espectral $[A(E)]$. $A(E)$ é obtida diretamente com a função de Green $[G(E)]$ pela relação:

$$[A(E)] = i([G(E) - G(E)^+]) \quad (2.16)$$

em que a função de Green tem o formato:

$$[G(E)] = [(E + i0^+)I - H_L]^{-1} \quad (2.17)$$

Com esse formato da função de Green a função espectral é dada pela função impulso δ

$$A(E) = \delta(EI - H_L) = \frac{i}{2\pi}([(E + i0^+)I - H_L]^{-1} - [(E - i0^+)I - H_L]^{-1}) \quad (2.18)$$

Sendo que a expressão numérica para delta é:

$$2\pi\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{2\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \right) = \frac{i}{x + i0^+} - \frac{i}{x - i0^+}$$

A função *tent* calcula a função espectral para a determinação da matriz de densidade. Como uma outra interpretação, a função de Green descreve a resposta do nanofio, como um sistema, à excitação por uma onda de energia E .

Na determinação de $G(E)$, é necessária uma inversão da matriz $[H]$, para fazer esse cálculo determinam-se os autovalores e os autovetores de $[H]$ implicitamente. O código que implementa a função de Green requer mais tempo de processamento por ter que fazer uma integração a cada iteração.

Apesar do esforço computacional dispendioso, esse método tem a vantagem de modelar sistemas abertos para o caso de não-equilíbrio.

Em um sistema fechado um elétron só pode ter uma energia de modo que o espectro fica concentrado na forma de um impulso. Se o sistema é aberto a conservação da energia do elétron é perdida, de modo que sua energia tem um espalhamento com valores próximos em uma distribuição gaussiana (Fig. 2.11). Esse espalhamento é determinado pelo valor finito de 0^+ na função espectral.

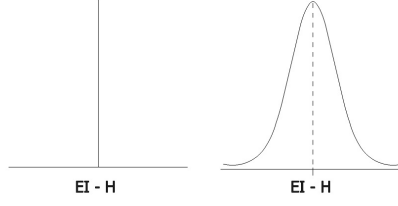


Figura 2.11: Distribuição Gaussiana

Pelo método da função de Green as condições limiares são descritas pelas matrizes de auto-energia Σ_1, Σ_2 que serão definidas no Cap.(2.6.2) . Elas descrevem o acoplamento do nanofio aos contatos levando em conta essa redistribuição espectral que ocorre em um sistema aberto acrescentando uma parte imaginária na Eq.(2.18) .

A implementação da matriz de densidade pela função de Green para o caso do equilíbrio no código:

```
rho =(1/2/pi)*quadv (@ (E) tent (E, Hl, U, KbT, densf, EFermi) ,
Emin-2*t0, EFermi+8*KbT, dne/100) ;
```

2.6.2 Auto-energia

A caracterização do acoplamento e dos processos dispersivos são dados pelas matrizes $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_S$. O conceito de auto-energia descreve interações entre elétrons e nesse caso modela o acoplamento a um contato semi-infinito.

A matriz de auto-energia ($\Sigma_{1,2}$) modela o efeito de acoplamento de um contato semi-infinito. Essa é uma grande simplificação já que o estudo de um nanofio conectado a um grande reservatório pode ser feito apenas na superfície de contato, o que, para esse caso, é apenas uma mudança em dois elementos da matriz do Hamiltoniano $H(1, 1)$ e $H(N, N)$. A matriz $[H]$ é modificada somando Σ_1 , que corresponde ao contato esquerdo e a matriz Σ_2 que corresponde ao contato direito.

A matriz Σ_1 é dada por:

$$\Sigma_1(E) = \begin{bmatrix} -t \exp(ik_1 a) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Assim adicionando o termo $-t \exp(i k_1 a)$ ao $H_L(1, 1)$ o acoplamento ao contato esquerdo é adicionado ao modelo. Similarmente para o contato direito $-t \exp(i k_2 a)$ é somado ao elemento $H_L(N, N)$.

Esse formato da matriz de auto-energia descreve os contatos como sendo transparentes para a transmissão do elétron. A condição limiar nos contatos determina que $\Psi_0 = \Psi_1 \exp[ik_1 a]$ e $\Psi_N = \Psi_1 \exp[ik_2 a]$

Assim a função de Green toma a forma:

$$G = [EI - H_L - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (2.19)$$

O acoplamento do nanofio a dois contatos metálicos pela Função de Green é caracterizado apenas como uma mudança da matriz $[H_L]$.

A matriz de auto-energia acrescenta a parte imaginária na matriz do hamiltoniano que faz a redistribuição da função espectral. As partes imaginárias são dadas pelas matrizes de Broadening Γ_1 e Γ_2 que podem ser diferentes para cada contato.

$$\Gamma_1 \equiv i[\Sigma_1 - \Sigma_1^+]$$

$$\Gamma_2 \equiv i[\Sigma_2 - \Sigma_2^+]$$

As duas funções espectrais que descrevem os contatos são diretamente determinados pelas matrizes de Broadening:

$$A_1 = G\Gamma_1 G^+$$

$$A_2 = G\Gamma_2 G^+$$

2.6.3 Função de Green para o não-equilíbrio

A condição de não-equilíbrio é dada quando o funcionamento do dispositivo envolve dois níveis de Fermi diferentes.

Como visto na Eq.(2.14), cada contato agora tem que ser descrito com uma função espectral diferente A_1 e A_2 . A diferença entre essas duas funções espectrais não é determinada pelo potencial eletroquímico μ , mas pelo potencial elétrico U .

O transporte no dispositivo se dá pela diferença dos níveis de Fermi de cada contato. Os elétrons no contato esquerdo tendem a ocupar os níveis de energia determinados por μ_1 e os elétrons no contato direito os níveis de energia determinados por μ_2 . O fluxo de corrente ocorre porque nem todos os níveis de energias são ocupados nos contatos.

A implementação no código do caso do não equilíbrio:

```
rho = (1/2/pi) * quadv (@ (E) tent_bias(E, Hl, U, KbT, densf, EFermieq, bias) ,
Emin-2*t0, EFermieq+8*KbT, dne/100) ;
```

O procedimento auto-consistente utilizando o método da função de Green é mostrado em fluxograma na figura 2.12.

Os parâmetros A_1 , A_2 , Γ_1 , Γ_2 e $G(E)$ são determinados pela função *tentbias*.

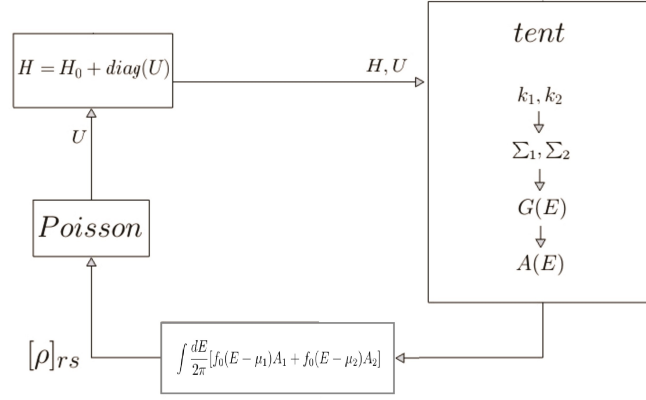


Figura 2.12: Fluxograma das iterações pela função do green

2.7 DETALHES DE IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO

As equações apresentadas determinam a densidade das cargas e o perfil de potencial ao longo do dispositivo se o potencial eletroquímico nos contatos for conhecido. A tecnologia de fabricação determina esse parâmetro pela dopagem do nanofio e pelo metal utilizado. No código implementado o potencial eletroquímico é determinado pela soma das cargas no dispositivo do perfil de dopagem e neste capítulo será demonstrada a implementação da determinação desse valor.

2.7.1 Potencial eletroquímico no equilíbrio

Quando o nanofio é acoplado aos dois contatos, uma nova distribuição de cargas deve ser obtida para que o sistema esteja em um único potencial eletroquímico (Fig. 2.13).



Figura 2.13: Redistribuição de cargas

A determinação do valor desse novo nível de Fermi é feita com iterações na função *ndiff*.

```
function z = nestedfun(ef)
for i = 1:length(D)
ferm(i) = 1 / (1 + (exp((D(i,i) - ef) / KbT)));
rhoes(i,i) = densf * ferm(i);
```

```

end
z = sum(Nd)-trace(rhoes);
end

```

Para esse problema é fixado um número de elétrons no dispositivo determinado pelo perfil de dopagem N_D , de modo que o número total de cargas do sistema com o nível de Fermi determinado seja igual a N_D .

O novo perfil de distribuição de cargas calculado é mostrado na figura 2.14.

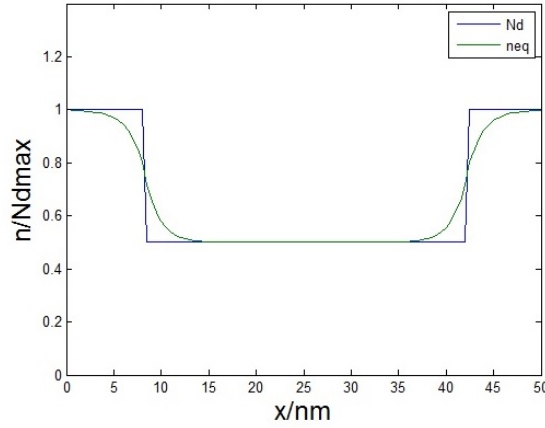


Figura 2.14: Novo perfil de distribuição de cargas

Para a resolução da função de Green no não-equilíbrio condições iniciais foram implementadas. Essas condições foram determinadas pela configuração do sistema em equilíbrio em todos os códigos por meio da diagonalização com condições de contorno periódicas, já que esta fornece os dados corretamente de maneira rápida. Como se sabe que o perfil de densidade não muda muito, isso permite uma convergência mais rápida da solução.

2.7.2 Condições limiares flutuantes

Para o caso de não-equilíbrio as condições limiares para um potencial fixo não permitem a convergência para uma solução, modo que o valor do potencial elétrico U nos contatos não pode ser obtido a partir de μ .

A condição de não-equilíbrio mostra uma queda de tensão não-uniforme ao longo do dispositivo. A queda de tensão ao longo do nanofio é menor que a tensão aplicada, indicando que determinado valor de tensão é perdido na região dos contatos. Esse fato não permite que o parâmetro U seja fixo como condição limiar para a solução do sistema.

Assim, ao invés de fixar o potencial nos contatos fixa-se um campo elétrico nulo e o potencial correspondente é determinado por integração. No cálculo dessa integral a constante de integração é determinada pelo número de cargas N_D . Como no equilíbrio, o número das cargas móveis deve ser igual ao número das cargas de dopagem essa relação determina a constante de integração. Na simulação a condição de equilíbrio foi determinada para uma temperatura de 300 Kelvin.

```

for posi=1:xnum
yint = Field(1:posi);
Ufield(posi) = a*trapz(yint);
end
Unew = Ufield+Ucac;
z = sum(Nd)-trace(rhoes);

```

Fixa-se o potencial eletroquímico μ_1 com o mesmo valor da situação de equilíbrio de modo que o cálculo de μ_2 é tido por:

$$\mu_1 = \mu_{eq}$$

$$\mu_1 - \mu_2 = -qV$$

Em que μ_{eq} é o potencial eletroquímico do equilíbrio.

2.8 TRANSPORTE COERENTE

O transporte de elétrons no mundo quântico segue leis bem diferentes daquelas observadas no mundo macroscópico. O primeiro fato a ser observado é que a condutância de um semiconductor no caso do nanofio é quantizada.

$$g = \frac{I}{V} = \frac{2q^2}{h} \quad (2.20)$$

$$\frac{1}{g} = 12.9k\Omega \quad (2.21)$$

Sendo esse o menor valor para a resistência.

O transporte é dito coerente por não sofrer processos dispersivos na transmissão do elétron.

Até aqui já foi apresentada a maior parte dos conceitos necessários para entender o transporte de cargas. Agora considera-se uma situação em que uma tensão é aplicada aos dois contatos, verificando a relação entre a tensão e a corrente (ver Fig. 2.5).

A diferença entre os dois níveis de fermi é determinada pela tensão aplicada $\mu_2 - \mu_1 = -qV$.

No código a função *tentbias* é a função a ser integrada para determinar a matriz de densidade no caso do não-equilíbrio:

```
tent_bias=(densf*fermi1).*spect1 + (densf*fermi2).*spect2;
```

Vale lembrar aqui que para determinar a matriz de densidade apenas a parte real da função espectral é utilizada, porém no cálculo da corrente é necessário incluir a parte imaginária.

2.8.1 Formalismo da transmissão e corrente

A corrente ao longo do dispositivo é completamente caracterizada pela matriz de densidade, na relação:

$$I = (-q) \text{Trace}(\rho J_{op}) \quad (2.22)$$

Para o cálculo da corrente é necessário que a matriz de densidade tenha sua parte real e sua parte complexa, assim a corrente calculada é a mesma para cada representação da matriz $[\rho]$.

O operador de corrente J_{op} é representado apenas na direção x, com o formato $-(i\hbar mL) \frac{d}{dx}$, que na forma matricial fica:

$$J_{op} = (t/\hbar N) \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & \dots \\ +i & 0 & -i & \dots \\ 0 & +i & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

J_{op} é determinado pela primeira derivada da função de onda do elétron. Assim como nas equações clássicas a corrente é definida por: quantidade de elétrons ($\text{Trace } \rho$) * velocidade (J_{op}) * carga (carga do elétron).

```
Jop=(t0/hev)*(zeros(xnum,xnum)-li*diag(ones(xnum-1,1),1)+
li*diag(ones(xnum-1,1),-1));
```

Para o cálculo da corrente é necessário obter apenas a matriz de densidade para aquele valor de tensão aplicada. Nos resultados verificamos que curva característica do nanofio é linear.

Fórmula alternativa para o cálculo de corrente:

$$I = (-q/h) \int dE \text{Trace}(\Gamma_2 A_1) [F_1 - F_2] \quad (2.23)$$

$$I = (-q/h) \int dE \text{Trace}(\Gamma_1 A_2) [F_1 - F_2] \quad (2.24)$$

Para obter a função de transmissão através da função de Green

$$T(E) = \text{trace}(\Gamma_1 A_2) = \text{trace}(\Gamma_2 A_1) \quad (2.25)$$

A função $T(E)$ fornece a transparência do canal para cada valor de energia.

$$I = (-q/h) \int dE T(E) [F_1 - F_2] \quad (2.26)$$

Para uma temperatura igual a 0 a função de Fermi tem a forma:

$$f_0 = \begin{cases} 1 & : E < \mu \\ 0 & : E > \mu \end{cases}$$

Numa rápida análise das equações Eq.(2.23) e Eq.(2.24) verificamos que quando os níveis de Fermi são iguais nos dois contatos ($F_1 = F_2$) o valor da corrente é nulo (caso de equilíbrio).

Agora, como no caso de não-equilíbrio, se $\mu_1 > E > \mu_2$, a diferença entre $F_1 - F_2$ é 1. Para o nanofio ideal $T(E) = 1$. Considerando-se dois canais (um para cada spin) a equação da corrente tem a forma:

$$I = \frac{-2q}{h} [\mu_1 - \mu_2] \quad (2.27)$$

sendo que $[\mu_1 - \mu_2] = -qV$ e V é a tensão aplicada entre os contatos. Assim provando a Eq.(2.20) .

Mesmo em seu funcionamento ideal, a transmissão no nanofio balístico não ocorre para todos os valores de energia acima da barreira potencial, como pode ser visto na figura 2.15. $T(E) = 1$ para alguns valores que são as chamadas energias de ressonância.

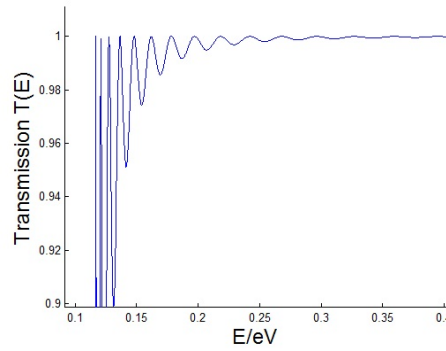


Figura 2.15: Função de transmissão típica de um nanofio balístico

Se o funcionamento ideal serve para $T(E) = 1$, a resistência por canal deve ter o valor de $12,9k\Omega$. De modo que para o funcionamento do dispositivo ($T(E) < 1$) a resistência do canal assume valores maiores que $12,9k\Omega$.

2.9 TRANSPORTE NÃO-COERENTE

O transporte de cargas é dito não-coerente se sofre processos dispersivos, que alteram tanto a energia quanto a direção do elétron. A função de Green no não-equilíbrio inclui processos dispersivos no modelo pela matriz de auto-energia Σ_S :

$$\Sigma_S = -j \begin{bmatrix} \eta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \eta & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \eta & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \eta \end{bmatrix}$$

A matriz de Broadening é dada por:

$$\Gamma_S = 2 \begin{bmatrix} F_1\eta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & F_1\eta & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & F_2\eta & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & F_2\eta \end{bmatrix}$$

a qual é criada no código com os comandos:

```
Sigs = zeros(m);
for is=1:nl
    Sigs(is,is) = -j*neta;
end
for is=nr+1:m
    Sigs(is,is) = -j*neta;
end
```

η é um parâmetro fenomenológico do processo dispersivo.

Nesse modelo de processos dispersivos foi considerado que eles só ocorrem na região dos contatos. Assim, modificam-se apenas os elementos da diagonal correspondentes à essa região. Neste trabalho o espalhamento é caracterizado apenas na região de alta dopagem.

Um modelo simples é caracterizado por contatos virtuais ao longo do canal [14] para caracterizar o espalhamento, como pode ser visto na figura 2.16.

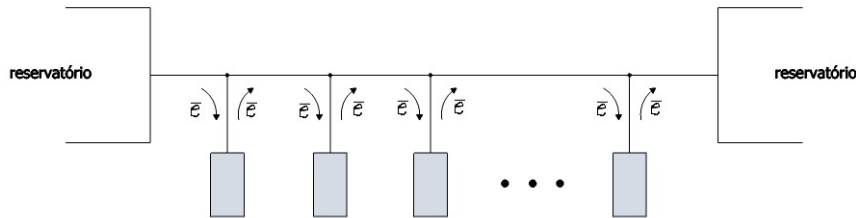


Figura 2.16: Processos dispersivos caracterizados como contatos virtuais

Neste código foi criada a função *ndiffu*, que fornece um potencial utilizando a função *tentbias*. Σ_S causa um espalhamento na energia do elétron.

A matriz de auto-energia de processos dispersivos depende da matriz de densidade, e essa relação é dependente da natureza do processo e o nível de aproximação usado. O formalismo da função de Green de não-equilíbrio permite calcular a matriz Σ_S para qualquer mecanismo de dispersão. Como uma analogia a matriz $[\Sigma_S]$ pode ser interpretada como um terceiro contato. No geral o contato virtual tem um nível de

Fermi não conhecido, tornando difícil a obtenção de F_S . No caso deste trabalho o valor F_S nas regiões de alta dopagem foi determinado por μ_1 e μ_2 .

Agora a função de Green toma a forma:

$$G = [EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2 - \Sigma_S]^{-1} \quad (2.28)$$

$$\Gamma_{1,2,S} = i[\Sigma_{1,2,S} - \Sigma_{1,2,S}^+]$$

$$2\pi[\rho(E)] = F_1[A_1] + F_2[A_2] + F_S[A_S] \quad (2.29)$$

$$A_S = G\Gamma_S G^+$$

Nesta simulação o parâmetro $\eta = 25meV$.

O processo dispersivo como sendo um contato virtual, causa a perda de energia do elétron porém a perda de energia não implica na diminuição da quantidade de partículas.

3 RESULTADOS E ANÁLISES

3.1 NANOFIO EM EQUILÍBRIO

A condição de equilíbrio no nanofio indica que nenhuma tensão é aplicada entre seus contatos. Os códigos *fio1ddf*, *fio1dd*, *fio1dgp* e *fio1dga* simulam o nanofio em equilíbrio com diferentes condições limiares.

3.1.1 Diagonalização com condições limiares nulas

Determinar condições limiares nulas significa aplicar barreiras de potencial nas extremidades do nanofio de modo que nenhum elétron entre ou saia do sistema.

A implementação de barreiras de potencial infinito nos limites do dispositivo serve apenas como uma análise inicial, afinal não se trata de uma condição real.

Essa condição foi implementada no código *fio1ddf* (tempo de 1.8 segundos), em que a matriz de densidade foi obtida pelo método da diagonalização e os perfis de densidade de cargas e de potencial obtidos são mostrados na figura 3.1.

Nos referiremos a N_D como sendo o perfil de dopagem do dispositivo e *neq* o perfil de distribuição de cargas no equilíbrio.

O poço de potencial é uma região que tem um mínimo de potencial elétrico onde alguns elétrons são capturados, e é visto na região dos contatos do dispositivo. Esse confinamento das cargas nas extremidades do nanofio é causado pela barreira de potencial, que não permite a transmissão de elétrons. Essa alta concentração de elétrons em um pequeno espaço provoca uma discretização local dos níveis de energia. Como são poucos os possíveis modos de onda nessa região, a soma dos quadrados das funções de onda produzem uma densidade não uniforme verificada por descontinuidades no perfil de densidade das cargas móveis nos contatos (Fig. 3.1 A).

Descontinuidades assim são verificadas em condições de contorno abruptas.

O nível de Fermi encontrado para o dispositivo é visto no gráfico do potencial (Fig. 3.1 B) e determinado pelo código como um valor constante ao longo do dispositivo, que é o requisito para o caso do equilíbrio.

3.1.2 Diagonalização com condições limiares periódicas

As condições limiares periódicas são utilizadas no estudo de materiais em estado de corpo sólido e serão aplicadas ao nanofio, determinando que as cargas que saem por uma extremidade entram pela extremidade oposta conservando o número de cargas no sistema.

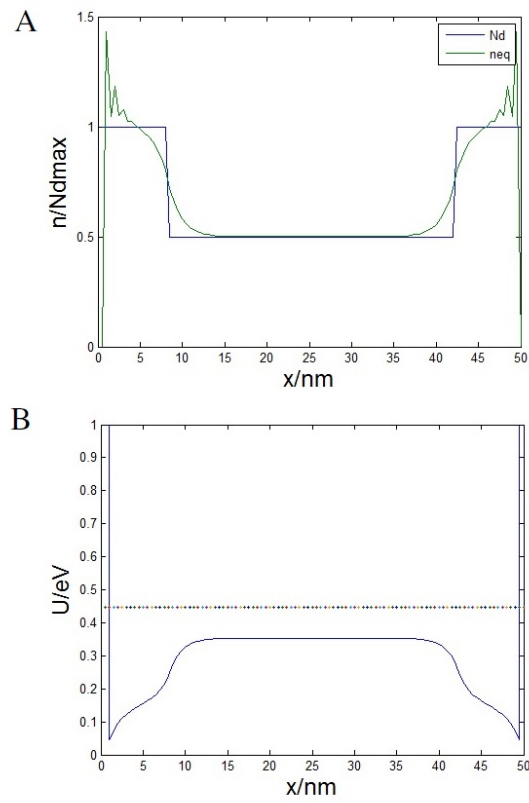


Figura 3.1: A, Perfis da densidade de cargas m3veis neq e da densidade de cargas de dopagem N_D ; B, Perfil da energia potencial para o nanofio em equil3brio com condi33es limi3res nulas.

O código que implementa essas condições e determina a matriz de densidade por diagonalização, *fio1ddp*, é rodado no início de todos os códigos que simulam o transporte coerente ou incoerente determinando as condições iniciais demorando apenas 0.89 segundos para os cálculos.

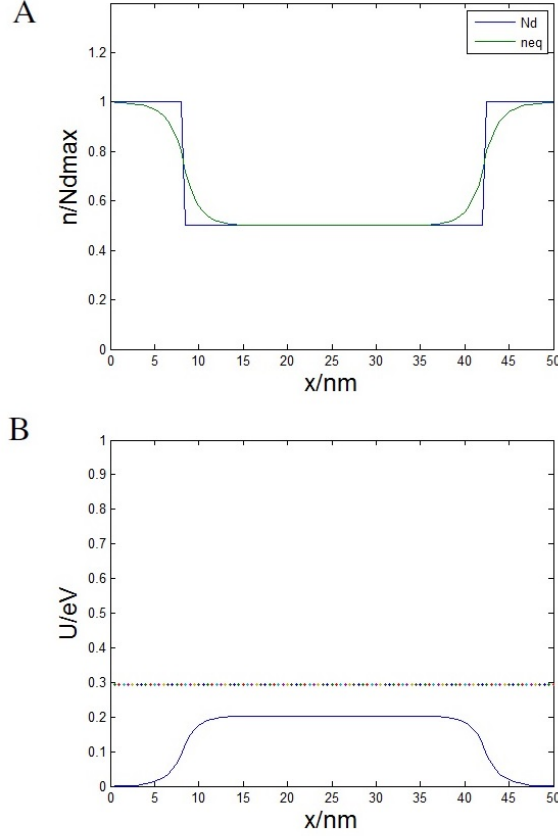


Figura 3.2: A, Perfis da densidade de cargas móveis neq e da densidade de cargas de dopagem N_D ; B, Perfil da energia potencial para o nanofio em equilíbrio com condições limiares periódicas.

Para condições limiares periódicas verificamos agora uma distribuição de cargas sem descontinuidades (Fig. 3.2 A). Onde a energia potencial é menor que o potencial eletroquímico maior é a probabilidade da ocupação dos níveis de energia por elétrons. Por isso na região dos contatos em que o valor da energia potencial é quase nulo, há uma maior concentração das cargas móveis.

A densidade de cargas móveis, neq , calculada tem o mesmo valor que a densidade de cargas na dopagem, N_D , nas extremidades do nanofio. Isso mostra uma boa aproximação do funcionamento do dispositivo já que na região de alta dopagem é suficiente para igualar o número de cargas móveis ao número de cargas de dopagem como é esperado na região dos contatos. A movimentação dos elétrons em um espaço maior que envolve os dois contatos cria uma distribuição de cargas mais uniforme fornecendo uma situação coerente.

A região de transição entre o contato e o nanofio não tem um nível de Fermi definido, porém no código damos o valor do nível de Fermi do contato mais próximo Fig.(3.3).

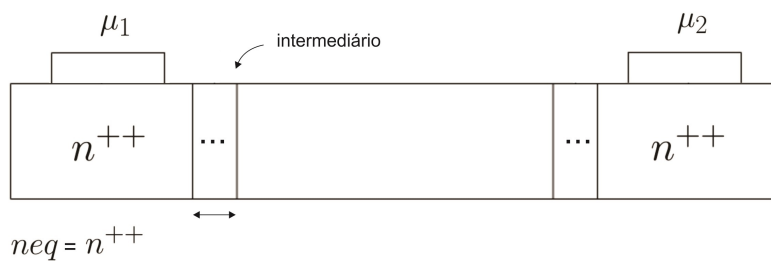


Figura 3.3: Região intermediária

3.1.3 Função de Green com condições limiares periódicas

Essa condição é implementada no código *fio1dgp*, em que usa-se a função de Green e uma matriz $[H]$ periódica com $\Sigma_1 = \Sigma_2 = 0$. A figura 3.4 mostra os resultados obtidos.

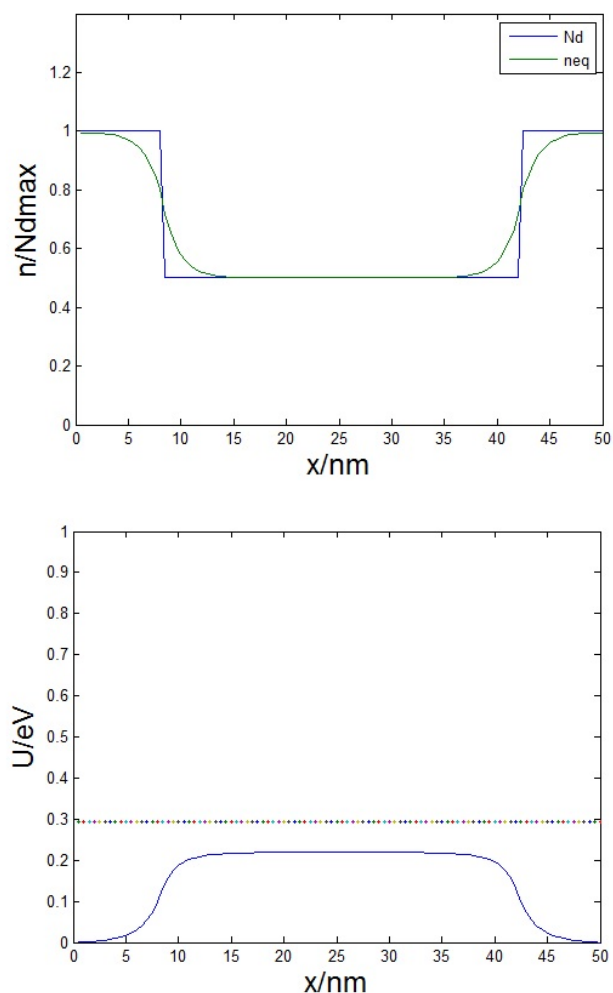


Figura 3.4: Condições limiares periódicas com a função de Green

Verifica-se uma consistência na solução. Os resultados são similares aos encontrados pelo método da

diagonalização mostrando a correta implementação do método da função de Green. O código demora a rodar mais do que o método anterior (182 segundos), pois uma integração precisa ser calculada a cada iteração. Esse método apesar de precisar de muito esforço computacional permite calcular condições limiares abertas.

3.1.4 Função de Green com condições limiares abertas

Com a matriz de auto-energia podemos focar no funcionamento do dispositivo apenas, permitindo um número indeterminado de elétrons entrando e saindo do dispositivo já que ao aplicar uma tensão um fluxo de elétrons tem início. Rodando o código *fioldga* obtemos os perfis de densidade e de potencial para essa condição (Fig. 3.5).

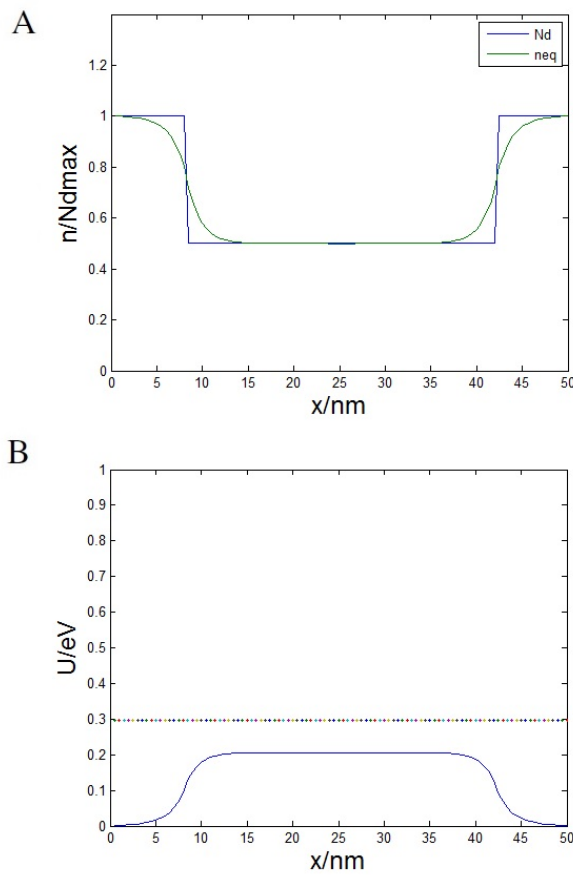


Figura 3.5: Condições limiares abertas

Verifica-se uma região de depleção onde a densidade de cargas móveis é menor do que a densidade de cargas de dopagem e uma região de acumulação nas extremidades do nanofio para o caso do equilíbrio com condições limiares abertas.

Um novo perfil de dopagem foi implementado no gráfico da Figura 3.6. O nanofio foi simulado como tendo dopagem nula. Nesse caso o perfil de potencial ao longo do nanofio ultrapassa o nível do potencial

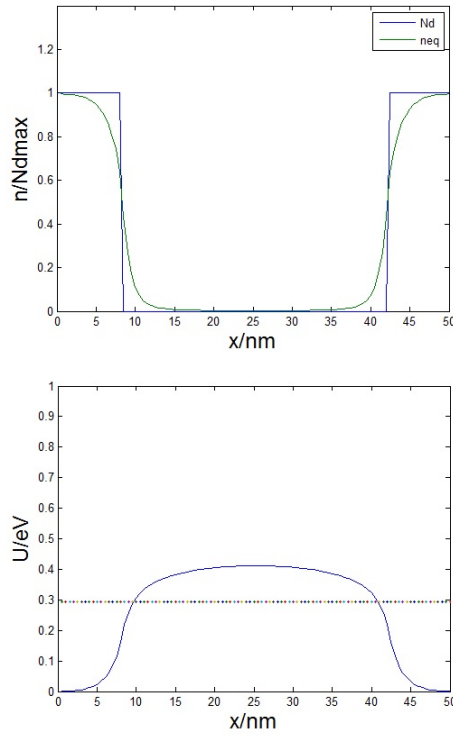


Figura 3.6: Condições limiaries abertas para um nanofio sem dopagem

eletroquímico e nenhuma carga móvel é encontrada ao longo do nanofio. A solução obtida teve resultados coerentes. O exemplo mostra que o código permite mudar o perfil de dopagem para o caso de materiais que não podem ser dopados, como por exemplo um nanotubo de carbono.

3.2 NANOFIO EM NÃO-EQUILÍBRIO

Agora o nanofio é submetido a uma tensão. Os códigos que implementam essa condição são: *fioldgbiascor* e *fioldgbiasincor*, caracterizando o transporte coerente e o transporte incoerente, respectivamente.

3.2.1 Função de Green com transporte coerente

O transporte coerente é caracterizado por não sofrer processos dispersivos, ou seja, o elétron é transmitido sem colisões conservando a energia. A transmissão do elétron é quase ideal, porém ainda mostra a característica da função de ressonância.

O código *fioldgbiascor* precisa ser rodado para cada valor de tensão determinado.

Para o caso de não-equilíbrio, o perfil de dopagem nula ao longo do nanofio não permite uma convergência do código, de modo que foi usada uma dopagem bem pequena, mas diferente de zero. Para cada valor de tensão aplicado ao dispositivo, o perfil de densidade permanece aproximadamente o mesmo (fig.

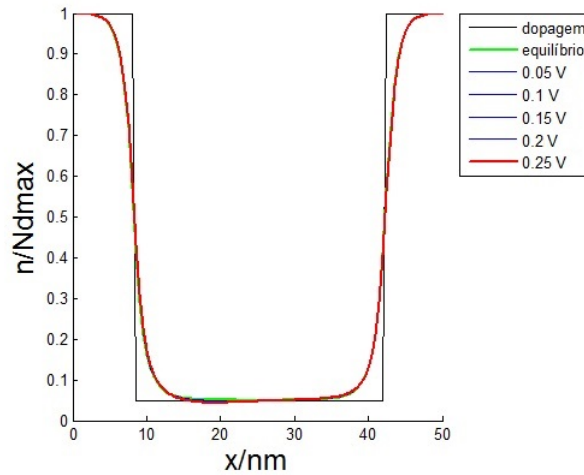


Figura 3.7: Perfil de densidade no transporte coerente

3.7). Já o perfil de potencial elétrico, apesar de ter o mesmo formato, diminui proporcionalmente quando a tensão é aumentada.

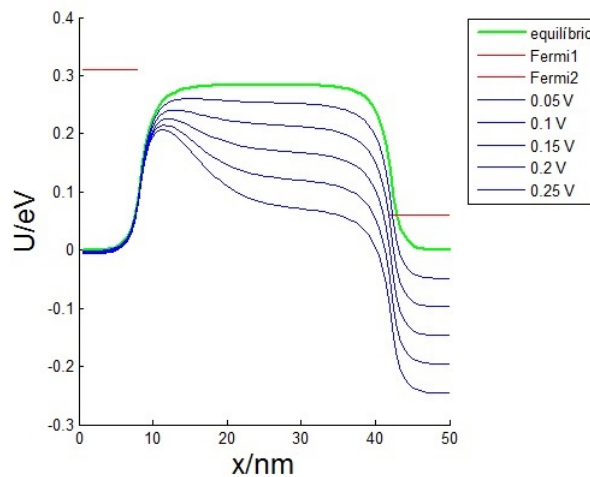


Figura 3.8: Potencial elétrico no transporte coerente

Verifica-se que o potencial elétrico tem valores numéricos bastante próximos no início do canal Fig.(3.8), porém na outra extremidade, para cada valor de tensão, o potencial tem valores bem diferentes. A diferença entre dois perfis de potencial elétrico se dá pela variação da tensão. A queda de tensão ao longo do nanofio é menor do que a tensão dada relação

$$V = \frac{\mu_1 - \mu_2}{-q}$$

Na entrada do canal existe uma barreira de potencial e apenas elétrons com energia maior que a barreira podem ser transmitidos. Dado um valor de tensão específico a comparação entre o perfil do potencial elétrico e sua função de transmissão $T(E)$ deixa claro como o transporte de cargas ocorre no dispositivo.

A função de transmissão tem valor zero até um determinado nível de energia em elétron-Volts como

visto no gráfico de $T(E)$ (Fig.3.9). Um elétron com essa energia já pode ser transmitido por cima da barreira de potencial, o que é indicado pelo valor de $T(E) = 1$ para maiores valores. A possibilidade de tunelamento de elétrons que possuem energias próximas à barreira de potencial fazem com que a função de transmissão passe do valor zero para um com uma inclinação mais suave.

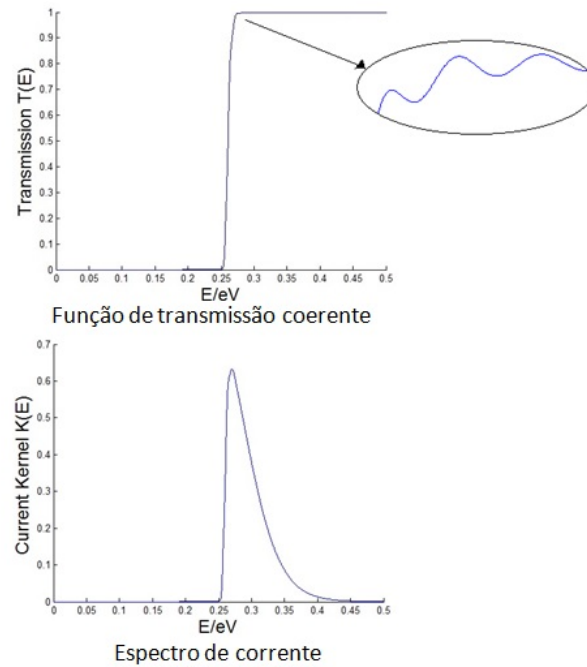


Figura 3.9: Transmissão do transporte coerente

Para pequenos valores de voltagem, o modelo segue uma mudança linear no perfil de potencial. Para maiores valores essa mudança é exponencial. O formato da função kernel $K(E)$ mostra que não existem no sistema elétrons com níveis de energia acima do nível de Fermi, de modo que a função volta a ter valor zero quando esse nível é ultrapassado. A comparação entre as funções de transmissão para vários valores de tensão aplicadas pode ser vista na figura 3.10.

O valor da corrente é calculado como sendo a integral da função $K(E)$, ou seja, a área embaixo da curva.

Como se vê no gráfico da curva característica (Fig.3.11) a relação é linear, porém é necessário diferenciar a curva do dispositivo como um todo e a característica verificada apenas no nanofio.

Um paralelo pode ser feito entre o perfil de potencial elétrico e a curva característica. Essa diferença na inclinação das retas do dispositivo e no nanofio indica que a resistência na região dos contatos é relativamente elevada e precisa ser determinada adequadamente.

Por meio da função *analyse* verifica-se a resistência do dispositivo para o transporte coerente. A corrente foi calculada para 5 valores de tensão: 0,05V, 0,1V, 0,15V, 0,2V e 0,25V.

Vemos que o transporte pode ser coerentemente modelado. I_{dev} é a corrente calculada para todos os valores determinados de tensão externa pela função de Green. I_{fit} é o modelo linear aproximado. Para diferenciar a análise do dispositivo como um todo e apenas a análise dentro do nanofio calcula-se a característica corrente como uma função da tensão interna. A aproximação entre o modelo linear e o dispositivo

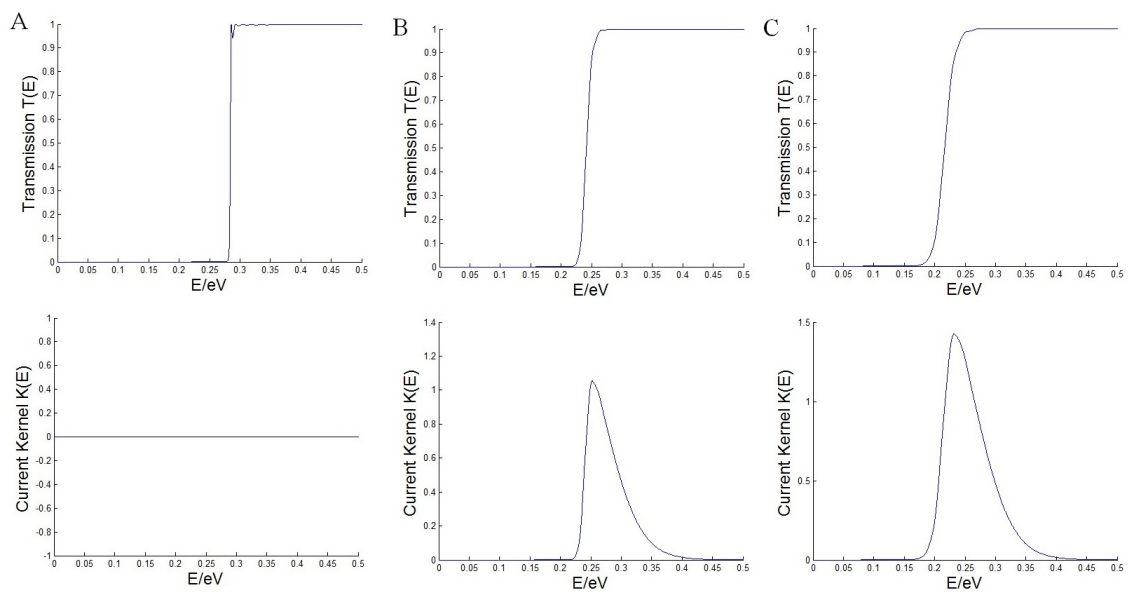


Figura 3.10: Função de transmissão $T(E)$ e de $K(E)$ para: A, tensão=0 ; B, tensão=0.15 ; C, tensão=0.25

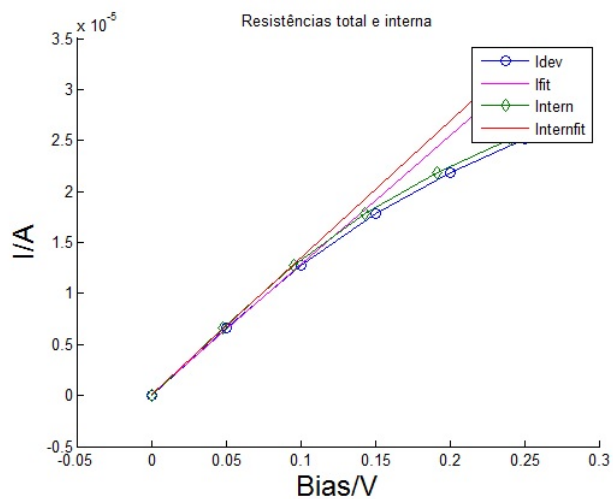


Figura 3.11: Curva Característica para o transporte coerente

simulado é muito boa para pequenos valores de tensão (abaixo de 0.1 V). Seguindo o modelo linear para valores abaixo de 0.1 V calcula-se uma resistência de aproximadamente $13.3k\Omega$. A derivação de um modelo linear se deve a um perfil de barreira de potencial no início do nanofio. Essa diferença é verificada no perfil de potencial elétrico Fig.(3.8). Calcula-se a diferença entre a tensão aplicada e a tensão interna ao longo do nanofio. Esse valor é determinado por

$$V_{Intern} = \frac{U(x_{num}) - U(1)}{-q}$$

Calculando para o dispositivo com um perfil de dopagem com $N_D = 0.5N_{Dmax}$ as tensões aplicadas e a queda de tensão ao longo do nanofio são determinadas na tabela 3.1.

Tabela 3.1: Tensões aplicadas e Tensões no nanofio no transporte coerente

V_{extern}/V	V_{intern} / V
0.05	0.0307
0.10	0.0613
0.15	0.0920
0.20	0.1226
0.25	0.1531

A análise linear permite determinar a resistência total do nanofio e a diferenciação entre a resistência total do dispositivo e a resistência interna. Na tabela 3.2 verificam-se essas resistências para um perfil de dopagem de $0.5N_{Dmax}$ para o nanofio, de modo que uma comparação possa ser feita ao transporte incoerente como discutido no próximo capítulo.

Tabela 3.2: Resistências no transporte coerente

Resistência / $k\Omega$	total	canal	contato
nanofio	1.32	0.81	0.51
por canal	13.3	8.2	5.1

O valor de resistência do nanofio verificado é menor que o determinado como o mínimo ($12.9k\Omega$). Isso se deve ao fato de tratar-se de vários canais em paralelo. No nanofio simulado a quantidade de canais é aproximadamente 10. O número de canais é aproximado por:

$$nc = S \frac{m}{2\pi\hbar^2} (\mu_{eq} - U_{eq}^{max}) \approx 10.1 \quad (3.1)$$

Como esperado a resistência por canal é maior que $12.9k\Omega$. Verifica-se que apenas 60% da tensão está concentrada no canal.

A Eq.3.1 aproxima o número de canais para cada spin e é uma consequência da soma sobre os modos transversais.

3.2.2 Função de Green com transporte incoerente

Incluindo no modelo processos dispersivos na região dos contatos, o transporte incoerente é modelado. Na função *foldgbiasincor* determina-se o perfil da densidade de cargas (Fig. 3.12).

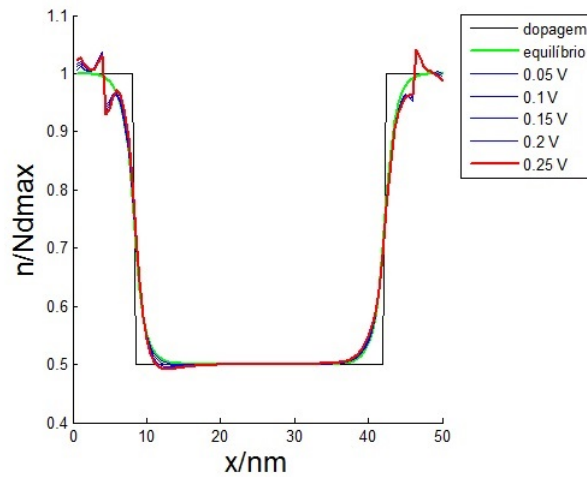


Figura 3.12: Perfil de densidade de cargas no transporte incoerente

Nesse modelo verificamos descontinuidades na região dos contatos, porque os processos dispersivos não podem ser localizados.

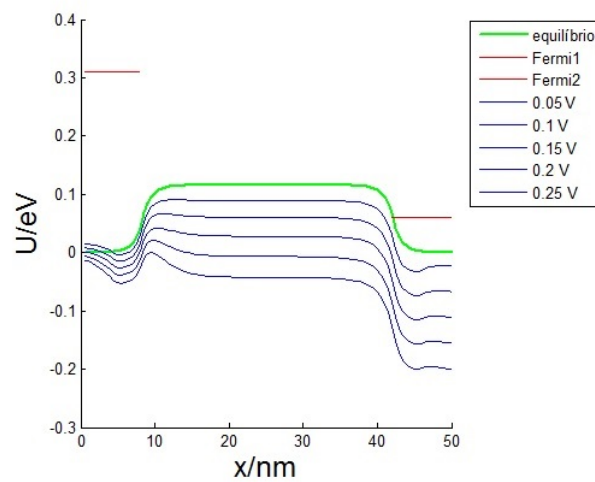


Figura 3.13: Perfil do potencial elétrico no transporte incoerente

No contato esquerdo há um acúmulo de elétrons, aumentando o valor do potencial elétrico nessa região, como visto na figura 3.13.

Assim que os elétrons saem do contato e entram no nanofio encontram uma barreira de potencial que impede a transmissão dos que têm menores níveis de energia.

O perfil de potencial para as mesmas tensões aplicadas difere drasticamente do modelo coerente. A transmissão começa em valores mais baixos de energia neste caso porque o modelo de espalhamento aplicado não cria uma barreira de potencial de valores tão elevados. Outra diferença na função $T(E)$ para essa condição é a ocorrência de picos mais espaçados entre si (Fig. 3.14).

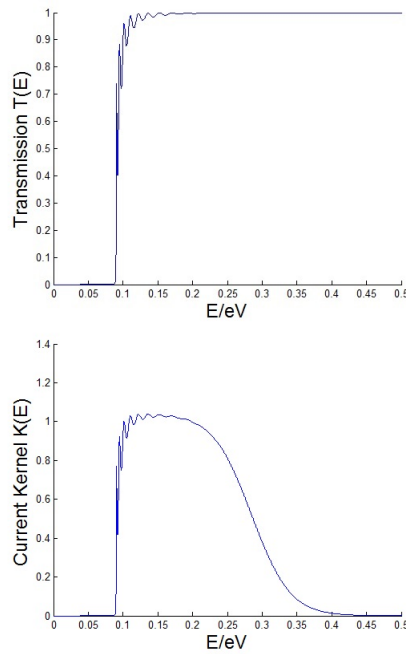


Figura 3.14: Exemplo de função de transmissão do transporte incoerente

A transmissão ocorre para alguns valores de energia que entram em ressonância com o sistema.

Elétrons com energia igual às autoenergias do nanofio como sistema fechado são facilmente transmitidos, enquanto elétrons com valores de energia diferentes não o são. Uma comparação pode ser feita entre as funções de transmissão para cada valor de tensão aplicada (fig. 3.15).

Por meio da função *analyse* verifica-se a resistência do dispositivo e a resistência do nanofio.

Verificamos que existe uma resistência dos contatos, já que a queda e tensão ao longo do fio é menor que a tensão aplicada nas extremidades do dispositivo. Isso pode ser visto pela diferença na inclinação das duas retas da Fig.(3.16). Vemos que a modelagem da curva característica pode ser feita por um polinômio linear, que é determinado na linha do código:

```
gertot = polyfit(current,bias,1);
```

Esse comportamento linear se deve ao perfil de potencial elétrico, que não mostra um aumento significativo na altura da barreira significativa perto do contato esquerdo. As diferenças de valores entre as tensões aplicadas e as tensões ao longo do nanofio são calculadas na tabela 3.3.

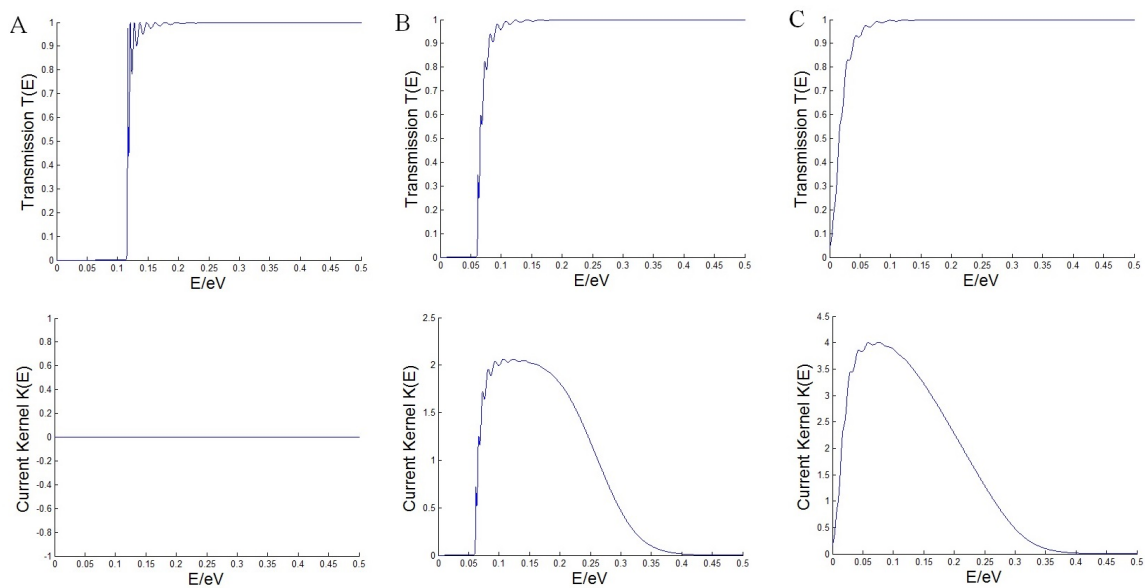


Figura 3.15: Função de transmissão $T(E)$ e $K(E)$ para o modelo com espalhamento: A, tensão=0 ; B, tensão=0.15 ; C, tensão=0.25

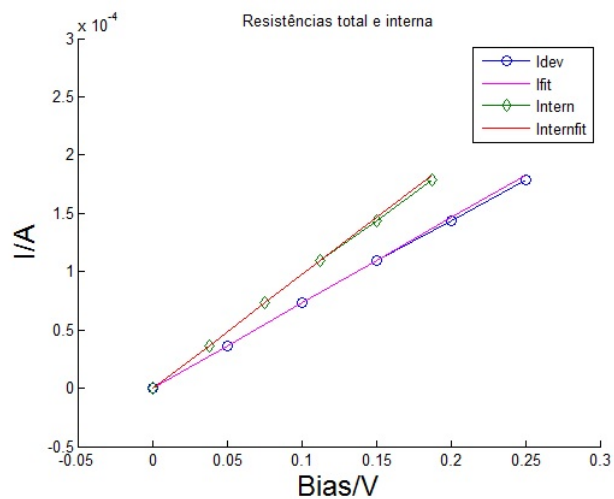


Figura 3.16: Curva característica do transporte incoerente

Tabela 3.3: Tensões aplicadas e Tensões no nanofio no transporte incoerente

V_{extern}/V	V_{intern} / V
0.05	0.0372
0.10	0.0746
0.15	0.1120
0.20	0.1496
0.25	0.1867

Pela análise do modelo linear:

Tabela 3.4: Resistências no transporte incoerente

Resistência / $k\Omega$	total	canal	contato
nanofio	1.37	1.02	0.35
por canal	13.8	10.3	3.5

Verifica-se na Tab.3.4 que apenas 75% da tensão está concentrada no canal.

Assim é constatado que para cada ponto no dispositivo a corrente não necessariamente tem o mesmo valor.

Essa diferença pode ser vista como um outro contato que recolhe e injeta energia no dispositivo, porém se ele não existe fisicamente tem que haver a conservação do número de elétrons.

Isso provoca uma diferença ao longo do canal, um contato virtual pode injetar mais elétrons enquanto um injeta elétrons de menos.

Como uma consequência o perfil de densidade mostra descontinuidades na região de alta dopagem. Assim o modelo escolhido não é suficiente para modelar o funcionamento na região dos contatos e um modelo mais sofisticado deve ser aplicado.

4 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi implementado o simulador de um dispositivo que consiste em um nanofio semicondutor acoplado a dois contatos metálicos submetidos a uma tensão.

A determinação do modelo foi feita com base nos princípios de mecânica clássica e de mecânica quântica.

Dois métodos foram utilizados para simular o dispositivo no equilíbrio: o método da diagonalização e o método da função de Green.

Foi verificado que as condições limiares são fundamentais para a modelagem do dispositivo e devem ser muito bem determinadas para uma solução correta.

Diferentes modelos para os contatos foram implementados: condições limiares fechadas, condições limiares periódicas e condições limiares abertas.

Os resultados obtidos indicam que condições limiares nulas não modelam o dispositivo adequadamente e que condições periódicas fornecem soluções apenas para o caso do equilíbrio.

No caso em que o nanofio é submetido a uma tensão o formalismo da função de Green do não-equilíbrio foi aplicado para a implementação do simulador e condições limiares flutuantes foram utilizadas para determinar o potencial na região dos contatos.

Mesmo no funcionamento ideal do nanofio balístico a condição de não-equilíbrio gera uma queda de tensão na região dos contatos. Assim, um modelo matemático que represente esse dispositivo em um circuito precisa incluir essa queda de tensão que não se dá ao longo do nanofio.

No caso do funcionamento balístico foi calculada uma queda de 40% da tensão aplicada na região dos contatos e no modelo com espalhamento, uma queda de 25%.

O modelo aplicado nessa simulação para o processo de espalhamento é o modelo de Buttiker probes, que inclui contatos virtuais representando o espalhamento da energia.

A simulação do nanofio para o transporte coerente mostra uma região do contato que se distancia do modelo ôhmico por causa do surgimento de uma barreira de potencial na entrada do canal. Já o funcionamento do modelo com espalhamento na região dos contatos (transporte incoerente) tem uma característica linear que foi modelada e suficientemente aproximada por uma função linear.

A resistência calculada do dispositivo é menor do que a mínima resistência de um nanofio de silício. Isso é determinado pelo fato de termos vários canais em paralelo, dividindo a corrente.

O código foi implementado na plataforma MATLAB com um total de 18 arquivos totalizando 1976 linhas. A característica modular do código permite a inclusão de um terceiro contato para modelar dispositivos de três terminais como um nanotransistor, por exemplo.

A continuação desse estudo em futuros trabalhos seria a implementação de um outro modelo para a região dos contatos que determine o perfil do potencial eletroquímico ao longo do dispositivo para transporte

incoerente, de modo que a região dos contatos seja precisamente modelada. A aplicação da equação de Poisson em três dimensões para uma análise espacial da distribuição das cargas mais completa é um outro processo a ser incorporado ao modelo futuramente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BUTTIKER, M. Disponível em: <<http://www.itrs.net>>.
- [2] JAVEY A. GUO, J. W. Q. L. M. D. H. Ballistic carbon nanotube field-effect transistors. *Nature*, v. 424, p. 654 – 657, 2003.
- [3] VENOGUPAL R. REN, Z. e. L. M. S. Simulating quantum transport in nanoscale mosfets: Ballistic hole transport, subband engineering and boundary conditions. *IEEE Transactions on nanotechnology*, v. 2, p. 135 – 143, 2003.
- [4] RAHMAN A. GUO, J. D. S. e. L. M. S. Theory of ballistic nanotransistors. *IEEE Transactions on electron devices*, v. 50, p. 1853 – 1864, 2003.
- [5] FERRY D. K. E GOODNICK, S. M. *Transport in Nanostructures*. [S.l.: s.n.], 2009.
- [6] DATTA, S. Nanoscale device modeling: The green's function method. *Superlattices and Microstructures*, v. 28, p. 253 – 278, 2000.
- [7] MORAJAD R. G. E DATTA, S. Nonequilibrium green's function based models for dephasing in quantum transport. *Phys. Rev. B*, v. 75, p. 081301, 2000.
- [8] DATTA, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1997.
- [9] IMRY, Y. *An Introduction to Mesoscopic Physics*. [S.l.]: Oxford University Press, 1997.
- [10] Disponível em: <<http://wikienergia.com>>.
- [11] HAYT W. H. E JOHN, A. *Engineering Electromagnetics*. [S.l.]: McGraw-Hill, 2012.
- [12] Disponível em: <<http://pt.wikipedia.org/wiki>>.
- [13] DATTA, S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.
- [14] BUTTIKER, M. *Phys. Rev. B*, v. 33, p. 3020, 1986.

